

Факторный анализ спектров сечения неупругого рассеяния электронов Al

Хохлова Татьяна Николаевна

Игуменов Александр Юрьевич, Паршин Анатолий Сергеевич

Сибирский государственный университет науки и технологий имени М. Ф. Решетнева

Игуменов Александр Юрьевич, к.ф.-м.н.

tanya.xo.xo03@gmail.com

В настоящее время актуальное значение имеют исследования в области нанотехнологий, которым поспособствовало получение и изучение разнообразных наноматериалов, применяющихся в микро- и нанoeлектронике. В свою очередь возникла необходимость знаний о свойствах используемых материалов. Для достижения поставленных задач применяют один из методов электронной спектроскопии – спектроскопия характеристических потерь энергии электронов (СХПЭЭ).

Также возникает необходимость в математических методах обработки, экспериментально полученных данных. Одним из наиболее перспективных и точных математических методов является факторный анализ. Работа [1] подтверждает возможность использования факторного анализа для изучения спектров сечения неупругого рассеяния электронов. Алюминий широко используется в создании таких устройств нанотехнологии, как фотоэлектрические преобразователи, перспективные для применения в аэрокосмической отрасли. Актуальными являются наноструктурированные покрытия и материалы, обладающие большим количеством полезных свойств. Этим обусловлен интерес к применению алюминия в качестве материала для нанесения защитных покрытий. В данной работе проведено исследование спектров сечения неупругого рассеяния электронов Al методом факторного анализа.

Спектры характеристических потерь энергии электронов Al (СХПЭЭ) были получены на сверхвысоковакуумном фотоэлектронном спектрометре SPECS (Германия) при энергиях первичных электронов 200, 300, 400, 600, 800, 1000, 1200, 1500, 1900, 2500, 3000, 3500 эВ с шагом 0,1 эВ. В спектрах ХПЭЭ основным параметром, служащим для анализа исследуемых материалов, является энергия характеристических пиков объемного плазмона. Проведен анализ спектров сечения неупругого рассеяния электронов Al.

Спектры сечения неупругого рассеяния электронов (Кλ-спектры) представляют собой произведения средней длины неупругого пробега электронов λ и дифференциального сечения неупругого рассеяния $K(E_0, E_0 - E)$ [5], где E_0 и E – соответственно энергии первичных и отраженных электронов, $T = E_0 - E$ (1) – потери энергии электронов. Спектры сечения неупругого рассеяния электронов рассчитаны из экспериментальных спектров потерь энергии отраженных электронов с помощью программного пакета QUASESTM XS REELS [6], согласно алгоритму [5].

Спектры сечения неупругого рассеяния электронов Al рассчитаны на основе экспериментальных СХПЭЭ Al [2-5]. На спектрах сечения неупругого рассеяния электронов Al наблюдаются пики, соответствующие поверхностному и объемному плазмону при энергиях 10,5 эВ и 15,1 эВ соответственно (рис.1).

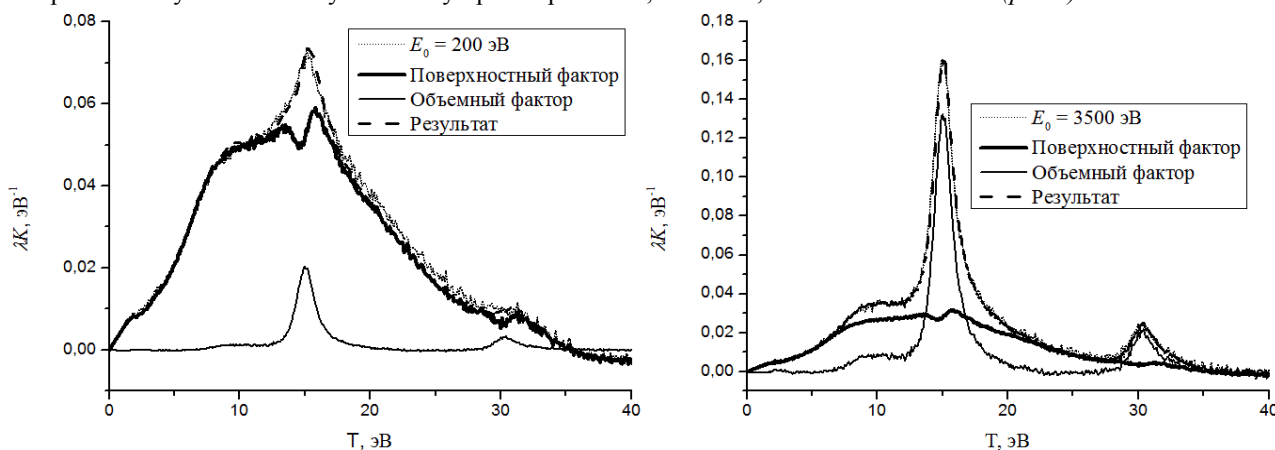


рис.1. Спектры сечения неупругого рассеяния Al исследованные посредством применения факторного анализа при энергии первичных электронов $E_0=200$ эВ и $E_0=3500$ эВ.

Спектры сечения неупругого рассеяния электронов имеют преимущества в исследовании процессов взаимодействия электронов с веществом по сравнению со спектрами потерь энергии электронов, поскольку в них вычтен фон многократного рассеяния, а интенсивность потерь измеряется в абсолютных единицах [2-5]. Но при разложении на спектры сечения неупругого рассеяния электронов, наблюдаемые пики сливаются. В этом случае, данные пики были разделены, для их разделения использовался факторный анализ. С помощью

матричного умножения и подбора коэффициентов, исходный спектр удается представить как сумму объёмного и поверхностного вкладов [1].

Факторный анализ использован для разделения спектров сечения неупругого рассеяния электронов. Подтверждена объёмная и поверхностная природа вкладов посредством возрастающей и убывающей зависимостей

Список публикаций:

- [1] Jin, H. *Measurement of optical constants of Si and SiO₂ from reflection electron energy loss spectra using factor analysis method* // *Journal of applied physics*. 2010. № 107. P. 083709, 1-11.
 [2] Игуменов А. Ю., Паришин А. С., Михлин Ю. Л. и др. *Расчет вероятности генерации поверхностных возбуждений электронами, отраженными от поверхности Si* // *Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета имени академика М. Ф. Решетнева*. 2014. Том 56 (4). С. 230-235.
 [3] Паришин А. С., Игуменов А. Ю., Михлин Ю. Л. и др. *Сравнительный анализ спектров характеристических потерь энергии электронов и спектров сечения неупругого рассеяния в Fe* // *Физика твердого тела*. 2016. Том 58 (5). С. 881-887.
 [4] Паришин А. С., Игуменов А. Ю., Михлин Ю. Л. и др. *Исследование дисилицида железа методами электронной спектроскопии*. // *Журнал технической физики*. 2016. Том 86 (9). С. 136-140.
 [5] Tougaard S. *Differential inelastic electron scattering cross sections from experimental reflection electron-energy-loss spectra: Application to background removal in electron spectroscopy* // *Phys.Rev. B*. 1987. Vol. 35 (13). P. 6570-6577.
 [6] QUASES – *Software packages to characterize surface nano-structures by analysis of electron spectra*. [Электронный ресурс]. URL: <http://www.quases.com> (дата обращения: 09.04.2018)

Исследование спектра высокого разрешения полосы $4\nu_2$ молекулы H_2S

Чжан Фанцэ

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Улеников Олег Николаевич, д.ф.-м.н.

1946529618@qq.com

H_2S является одним из наиболее важных химических соединений, применяемым во многих областях химии, астрофизики, атмосферной оптики, планетологии и т.д. Как следствие, возникает необходимость в хорошем знании тонкой структуры спектров поглощения сероводорода в разных областях шкалы электромагнитных волн, в частности, в инфракрасном диапазоне.

Инфракрасный Фурье спектр молекулы H_2S был зарегистрирован в Техническом Университете Брауншвейга (Германия) в диапазоне $3400 - 10400 \text{ см}^{-1}$ с помощью Фурье-спектрометра Bruker IFS125HR, оснащенного оптической ячейкой из нержавеющей стали при температуре 294 К с давлением 20 мбар, эффективной длиной поглощения 163 м и спектральным разрешением $0,01 \text{ см}^{-1}$. На рисунке 1 проведен обзорный спектр в диапазоне $4400 - 5600 \text{ см}^{-1}$, в пределах которого расположены все полосы первой гексады $4\nu_2$, $\nu_1+2\nu_2$, $2\nu_2+\nu_3$, $2\nu_1$, $\nu_1+\nu_3$ и $2\nu_3$, а также указаны центры исследуемых полос.

Молекула H_2S является молекулой типа асимметричного волчка с параметром асимметричности $k = (2B-A-C)/(A-C) \sim 0,532$. Группа симметрии этой молекулы изоморфна точечной группе симметрии C_{2v} . Три колебательные координаты, q_1 , q_2 , q_3 , такого типа молекул преобразуются при операциях симметрии по неприводимым представлениям A_1 (координаты q_1 и q_2) и B_1 (координата q_3) [1-2]. В этой работе выполнено исследование полосы $4\nu_2$, правила отбора для переходов которой имеет следующий вид: $\Delta J = 0, \pm 1$; $\Delta K_a = \pm (2n + 1)$; $\Delta K_c = \pm (2m + 1)$.

Как видно из рисунка 1, полоса $4\nu_2$ расположена достаточно изолированно относительно других полос, так что влияние остальных состояний первой гексады на колебательно-вращательную энергетическую структуру исследуемого состояния достаточно мало, вследствие чего для решения обратной спектроскопической задачи можно использовать модель эффективного гамильтониана изолированного состояния [3]. В этом случае гамильтониан имеет вид оператора Уотсона в A -редукции и I' представлении [3-4]:

$$\begin{aligned} H^{v,v} = E^v + & \left[A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J^2 + \frac{1}{2}(B^v - C^v) J_{xy}^2 \\ & - \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z^2 J^2 - \Delta_J^v J^4 - \delta_K^v [J_z^2, J_{xy}^2] - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 \\ & + H_K^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 J^4 + H_J^v J^6 + [J_{xy}^2, h_K^v J_z^4 + h_{JK}^v J_z^2 J^2 + h_J^v J^4] \\ & + L_K^v J_z^8 + L_{KKJ}^v J_z^6 J^2 + L_{JKJ}^v J_z^4 J^4 + L_{KJJ}^v J_z^2 J^6 + L_J^v J^8 \\ & + [J_{xy}^2, l_K^v J_z^6 + l_{KJ}^v J_z^4 J^2 + l_{JK}^v J_z^2 J^4 + l_J^v J^6]_+ + P_K^v J_z^{10} \end{aligned} \quad (1)$$